

Automated crystallographic supporting system for high-throughput protein structure determination

蛋白質構造解析支援ソフトウェアの開発

Yukuhiko Asada¹, Hideyuki Taka^{1,2}, Michihiro Sugahara¹, Haruhiko Ayama¹, Hisashi Ukawa^{1,2}, Naoki kunishima¹

浅田 征彦¹, 高 秀幸^{1,2}, 菅原道泰¹, 阿山 晴彦¹, 卯川 尚史^{1,2}, 国島 直樹¹

(¹RIKEN Harima Institute, Highthroughput Factory., ²Hitachi Software Engineering Co. Ltd.)

(¹理研ハイスループットファクトリー, ²日立ソフトウェアエンジニアリング)

e-mail: asada@spring8.or.jp

ハイスループットファクトリーでは、タンパク3000プロジェクトの一環として、構造ゲノム科学に寄与するための蛋白質結晶構造解析及び関連技術開発を行っている。蛋白質結晶構造解析の高速化のためには、構造解析のそのものの効率化に加え、得られた立体構造を評価する作業もまた効率化が必要がある。我々はこれまでの2年間、耐熱菌由来蛋白質の結晶解析業務を通じてこれら効率化のためのノウハウの蓄積を行ってきた。これからは蓄積された構造解析のノウハウをいかに効率化に結びつけるかを考える必要があるが、今年度は 1) 標準解析システムの開発、及び、2) 構造評価データ自動作成プログラムの開発を行っている。今回、標準解析システムの開発項目のうち、位相決定部と重原子検索データベース部分、及び、構造評価データ自動作成プログラムの開発項目のうち、アライメント配列図作成部分について、開発状況を紹介する。

1) 標準解析システムの開発

【自動位相決定部分】 これまで熟練した研究者が行っていた解析手順を構造解析に一般的に用いられているソフトを有機的に連携することにより、解析未経験者でも正しい手順で解析ができるようにすることを目的とする。

【重原子検索データベース】 ハイスループットファクトリーでの重原子実験情報、並びに文献、PDB等から重原子実験データ情報を抽出、データベース化し、アミノ酸配列と結晶化条件等の入力により、試すべき重原子スクリーニング条件を優先順位付きで提示することを目的とする。

2) 標準解析システムの開発

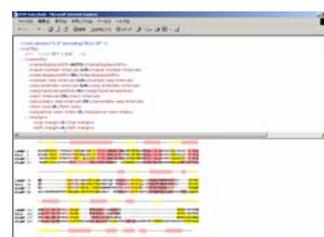
【アライメント配列作成部分】 通常、論文用にアライメントに関する図を作成する場合、普通のドローツールや、Wordなどの文書作成ツールを用いていた。本ツールは、論文のアライメント作成に特化することにより、構造評価の省力化を図ることを目的とする。



自動位相決定ソフト



重原子データベース



アライメント配列作成ページ